

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 28 日現在

機関番号：94309

研究種目：挑戦的研究（開拓）

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06233・20K20295

研究課題名（和文）正確な予言的相対性量子化学の開拓

研究課題名（英文）Pioneering the Accurate, Predictive, and Relativistic Quantum Chemistry

研究代表者

中辻 博（Nakatsuji, Hiroshi）

認定NPO法人量子化学研究協会・研究所・理事長

研究者番号：90026211

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 19,700,000円

研究成果の概要（和文）：予言的理論科学の基本は、化学や物質・生物科学を支配している量子力学の基礎方程式、シュレーディンガー方程式の正確な解法を確立し、その相対論的理論をも作る事である。量子力学の誕生以来この夢は永く続き、多くの試みの末、不可能とすら考えられた。そんな中、本研究者は2004-5年、世界で初めてこの非相対・相対の両式の一般解法を発表し、さらに本挑戦的開拓研究により、理論を完成の域に近づけた。その証拠に、本理論により計算されたリチウム分子の9個の基底・励起状態のポテンシャル・カーブは、精密な分光学実験の結果を完全に再現している。この正確な予言的量子化学の出現は、理論科学の飛躍をうながし先導するものである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

世界の暦や宇宙開発を理論的に支えているニュートン方程式の意義は、原理方程式とそれを正確に解く計算科学の重要性を示している。これ以上の意義が、物質世界を支配しているシュレーディンガー方程式の正確な解法の発見にあるが、長く不可能とされた。しかし本研究者は2004-5年世界で初めてこの方程式の正確な一般解法を発見し、更に本挑戦的開拓研究により、その理論を完成・実用化に近づけた。物質・生物世界の諸現象を正確に予言できる理論と方法の重要性は論を待たず、計算機の発達などと共に、近い将来必ず実用化できると確信される。文科省は、この研究の重要性を広く衆知し、学術的な事業を開始し、実用化へ導くことが求められる。

研究成果の概要（英文）：Schroedinger equation and related relativistic equation govern chemical, material, and biological sciences. Therefore, the methods of solving these equations have long been studied, but this attempt was even thought to be impossible. In such a circumstance, this investigator found in 2004 the basic theory of solving the Schroedinger equation and in 2005 extended it to the relativistic theory. Based on the studies thereafter, by performing this Challenging Research (Pioneering), we could have an outlook of almost reaching a goal of this way of the researches. A proof is that by applying the resultant theory of this Challenging Research to the calculations of the potential curves of the nine ground and excited states of Li<sub>2</sub> molecule, we obtained the accurate results completely reproducing the experimental RKR potential curves. This result shows that the accurately predictive quantum chemistry is almost in our hands. Comprehensive support to realize this project is necessary.

研究分野：予言的量子化学、量子物理学、理論生物化学、相対性理論、生命科学、計算科学、理論薬学、理論触媒化学

キーワード：シュレーディンガー方程式の正確な解法 自由完員関数理論 Free Complement Theory 予言的量子化学 相対論的量子化学 基底・励起状態の正確なポテンシャル面 多電子理論

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 宇宙の星や銀河系の惑星の運行を支配している方程式はニュートン方程式である。この方程式を正確に解くことにより、宇宙の世界の運行を正確に予言することができ、暦の基となっているだけでなく、これを使って人工衛星や宇宙旅行が実現している。相対論はこの様な対象ではごく小さな補正に過ぎず、あらかじめニュートン方程式を解くことで解決されている。このニュートン方程式にあたる化学の世界を支配している方程式はシュレーディンガー方程式であり、生物を形成している炭素・水素などからなる大部分の原子・分子はこの方程式に高精度で従っているはずである。相対論効果はここでも、極端に重い原子を除いて、小さいか2次的である。しかし、量子力学の定式化以後70年を経ても、科学者はこの式を解くことができず、むしろ解けない式であるとさえ言われていた。その結果、量子化学はこの方程式のかなり粗い近似によるしかなく、そこから得られる予言は定性的にすら問題があることも多く、実験科学者の切実な期待と要求を裏切ることも多かった。このような状況の中、シュレーディンガー方程式の正確で一般的な数学的解法が、本研究による研究のうへ2004年発表された(Phys. Rev. Lett. 93, 2004, 030403)。現在、自由完員関数理論 (Free Complement(CF) theory) と呼ばれている理論がそれである。その相対性理論は2005年、同じ Journal に発表された(Phys. Rev. Lett. 95, 2005, 050407)。これらの理論はその後比較的小さな原子や分子に応用されてその高精度な予言力が実証された。挑戦(開拓)研究の開始の頃、ようやく一般の原子や分子への応用が可能なまでに様々な付帯理論や計算プログラムなどが整い、挑戦研究でいくつかの本格的な計算を実行した。

### 2. 研究の目的

本研究は相対論的量子力学の基礎方程式を作り上げ、その解法を整備する事を目的としているが、そのためにはどうしてもまず非相対論的なシュレーディンガー方程式を基に正確かつ誰でも容易に解くことのできる方法論を作り上げることが前提となる。相対論的量子化学はその上に相対論効果として補充することができる。より本格的には1電子系の方程式でしかないDirac方程式を超えて多電子系に対する相対論的基礎方程式を作り上げ、それに基づく理論を構築することになる。本研究では、このような階層的な理論の共通の土台たるシュレーディンガー方程式の正確かつ容易な解法の完成に注力し、相対論を用いた解法の実用化を追求した研究も行う。この前人未至の研究も本課題の実行により大きく進展した。

### 3. 研究の方法

この夢のような理論研究テーマの推進に、定まった方法があるわけではない。この4年間の研究活動を振り返ってみると、まずは研究に道を付け軌道に乗せる事[テーマ1と2]、特殊だが可能な道を付けておくこと[テーマ4と5]、研究の王道を築くこと[テーマ7と8]、その最初の具体的な応用例[テーマ9]、その道すがらに得た成果[テーマ3と6]などに結晶している。

### 4. 研究成果

(1) Chemical Formula Theory による原子・分子の波動関数の計算 (J. Chem. Phys. 149, 2018, 114105) : シュレーディンガー方程式は積分も含まない3次元空間の1点1点における数学的条件を述べる局所的な方程式であり、化学でpopularな化学構造式(Cheical Formula)の局所概念とも符合する。そこでこの化学構造式に対応して原子・分子の基底・励起状態を記述する電子構造論を Chemical Formula Theory として提案した。Valence Bond 法、分子軌道法のいずれにも属さない化学の局所性と local な基底・励起状態概念に基づき、自由完員関数法(Free Complement (FC) theory)によって系のシュレーディンガー方程式の解へと展開される理論であり、今後の自由な発展が望まれる。シュレーディンガーレベルの定量性と分かりやすい化学概念を持つ電子構造理論として展開していきたい。

(2) 自由完員関数法(FC theory)による原子・分子のシュレーディンガー方程式の解の計算 (J. Chem. Phys. 149, 2018, 114106) : 自由完員関数法は、波動関数の中に上記2004年のPRLの論文で導入された Scaling 関数を含むため、多電子系では積分は不可能で、エネルギーと波動関数はシュレーディンガー方程式を条件式とするサンプリング法 (Local Schrödinger equation (LSE)法) によって計算する。この論文では、上記の Chemical Formula Theory を使って FC 波動関数を作り、筆者の local sampling 法と Metropolis 法を組み合わせる方法で変数を決める方法で、第2周期原子とホルムアルデヒドなどの分子のシュレーディンガー方程式を化学精度 (絶対エネルギーで kcal/mol 以下) という高精度で解くことができた。ただ、この Metropolis 法は計算時間もかかり勤められる方法でないことを実感し、2021年の Direct Local Sampling 法の開発につながるようになった。

(3) 積分変分法による Be と Li 原子の基底・励起状態の Free Complement Chemical Formula Theory による計算 (J. Chem. Phys. 150, 2019, 044105) : 3・4電子系ではあるが電子間距離  $r_{ij}$  を含んでいても積分が可能であり、同僚の中嶋博士が作成した Slater 関数に対する積分コードを使って、変分法でその基底・励起状態のシュレーディンガー方程式を高精度で計算した。

(4) 相対論的 Dirac-Coulomb 方程式を解くための inverse Hamiltonian 法における複素 scaling 法

の利用(Chem. Phys. Lett. 749, 2020, 137447) : 相対論的 Dirac-Coulomb 方程式の解法は Free Complement 理論の相対論への応用として 2005 年に発表した。その中で筆者が 2002 年に発表した inverse Hamiltonian 法(Phys. Rev. A 65, 2002, 052122) の有用性を示していた。ここでは、その計算の中で得られる物理的な解を complex scaling 法を用いて容易に選ぶことができることを示した。

(5) 1・2 電子積分のみを使うシュレーディンガー方程式の変分的解法 (Phys. Rev. A 101, 2020, 062508) : 現代の量子化学で使われる理論は、Hartree-Fock 法を始め、基底関数について 1・2 電子積分しか使わない変分法に基づいている。積分法に限ると、この程度が現在の計算機で化学現象をある程度研究できる限界だからである。シュレーディンガー方程式を高精度で解く自由完員関数理論からすればこの制約はかなりきついが唯一の方法がある。それは、2004 に筆者が発表した scaled Schrödinger 方程式の scaling function の 2 電子項  $g_{ij}$  を  $r_{ij}^2$  で近似することである。このような近似は、物理的には優れた関数形である Slater 関数  $\exp(-r_{ij})$  を Gauss 関数  $\exp(-r_{ij}^2)$  で置き換える方法が現代量子化学を支える近似として使われていることを想起すれば納得できると思う。このことは決してこの近似が良い近似であることをいうものではないが、「使える近似」かもしれないと考える基礎である。本論文ではこの  $r_{ij}^2$  を  $s_{ij}$  と呼び、これを使った自由完員関数理論、FC  $s_{ij}$  理論を提案した。実際この方法でも  $sp^3$  炭素原子のシュレーディンガー方程式の解を変分法で計算することができ、化学精度を達成できることを示した。しかし、その計算は必ずしも効率的に良いものではなかったため、精度的には今後色々な角度から検討することが必要であるが、使い易い変分理論として有用であろう。

(6) Free Complement  $r_{ij}$  法と  $s_{ij}$  法の組み合わせによる  $sp^3$  炭素原子のシュレーディンガー方程式の変分解法 (Phys. Rev. A 102, 2020, 052835) : 上記の方法の発展の一つに  $s_{ij}$  法と  $r_{ij}$  法を Free Complement 理論の枠組みの中で組み合わせて変分理論として使うことである。すでに積分計算の制約から Free Complement  $r_{ij}$  理論のみでは  $sp^3$  炭素原子の変分計算すら化学精度の結果を与えないことが分かっていた。そこで積分計算の容易な  $s_{ij}$  法と組み合わせることにより、 $r_{ij}$  と  $s_{ij}$  で 2 次以上の積分計算が可能になり、 $sp^3$  炭素原子のより高次な変分計算により、化学精度の結果を得ることができた。この方法は原子の系では他の原子についても可能で、すでに他の原子についてもすぐれた結果を得ている。しかし分子に対しては Free Complement  $r_{ij}$  理論の積分計算が不可能なため、この形での変分計算は不可能である。

(7) Scaled Schrödinger 方程式の正確な scaling 関数の開発 (J. Chem. Phys. 149, 2018, 114106) : Scaled Schrödinger 方程式は、原子・分子の Schrödinger 方程式の不完備性を補うため 2004 年に筆者によって導入された新しい式で、元の Schrödinger 方程式と等価な方程式で、 $g(H - E) = 0$  と書かれる。ここで  $g = \sum_{iA} g_{iA} + \sum_{ij} g_{ij}$  であり、 $i, j$  は電子を、 $A, B$  は原子核を表す。元のシュレーディンガー方程式はその変分表現が発散するため理論的完備性に欠け正しくないが、Scaled Schrödinger 方程式はその変分表現も正しく、理論的完備性を満たし正しい。 $g$  関数は上式のように粒子対の和の形をしている正の関数であるが、これらは電子間あるいは電子と核との衝突を表し、これが変分式の発散の原因であったのであるが、Scaled Schrödinger 方程式に基づく変分式では、 $g$  関数の存在のため発散は起こらない。そのためその変分表現を使ってシュレーディンガー方程式を解くことができるようになったのであり、2004 年以後の私たちの世界の追従を許さない高精度な研究がそれを物語っている。この scaling 関数は色々な選択が可能であり、小さな原子・分子ではその最適な座標系に伴う最適な選択などがある。より大きな分子では、一般的な直感的選択として、 $g_{iA} = r_{iA}$  と  $g_{ij} = r_{ij}$  を使ってきた。本論文ではこの直感的選択は必ずしも正しい選択ではなくもっと正確な正しい選択があることを示した。つまり、衝突領域  $r = 0$  ではクーロンポテンシャルの形から見て正しい関数形であるが、粒子が遠く離れた領域  $r = \infty$  では正しくない。Schrödinger 方程式と Scaled Schrödinger 方程式の等価性から  $r = \infty$  では  $g = 1$  になるべきであるのに、 $g$  になってしまふ。正しい選択としては、例えば  $g = 1 - \exp(-r)$  や Ei 関数、 $r/r+a$  などがある。本論文ではこれらの「正しい」 $g$  関数を提案しそれを使うと今までより正確な波動関数が得られることを、He の正確なシュレーディンガー解を求めることによって示した。この成果は、より正確な波動関数を得る上でとても大事な成果であったと考えている。

(8) Free complement (FC) - local Schrödinger equation (LSE) 法による原子・分子のシュレーディンガー解の計算のための Direct local sampling (DiLS) 法 (投稿中) : 上記(2)の論文の説明で少し述べたように、一般の原子・分子のシュレーディンガー解を求めることのできる FC theory では、容易には積分できない関数が表れる。上の「正しい関数」はその一つである。そこで我々は上記(2)で説明した LSE 法を使ってサンプリング法の手法でいわゆる「対角化」に代わる部分の計算を行う。この際サンプリング点の生成方法が問題になるが、よく使われるメトロポリス法は古典的統計手法であり、シュレーディンガー解の計算のような力学的な計算には向かない。必要なことはサンプリング点の分布関数は解となる関数の分布関数と出来るだけ近いことが求められる。これを数学的に満たすサンプリング点の生成法が inverse transformation 法または direct 法の名前で知られている。この方法は関数の可積分性を想定しているため、我々の場合それが満

たされる FC theory の初期関数を使ってサンプリング点を作る。この方法は筆者が古くから提唱してきた local sampling 法を数学的にまとめた形のものであり、Direct local sampling (DiLS)法と呼んでいる。この方法では正しいサンプリング点が正確に 1 回の計算で得られ、計算結果も再現性に優れたたぶれの無いユニークな値となり、計算時間も速く理論的にも優れている。いくつかの原子・分子に応用した結果も示したが、正しく化学精度を満たす正確なシュレーディンガー解が得られている。

(9)  $\text{Li}_2$  分子の低い 9 個の状態のポテンシャル・カーブの自由完員関数理論による計算 (投稿中): 上記 (7) と (8) で示した新しい理論の具体的な応用として  $\text{Li}_2$  分子の低い 9 個の基底・励起状態のポテンシャル・カーブを正しい  $g_{ij}$  関数を用いた FC-LSE (DiLS) 法で計算した。この対象の計算は 1985 年に筆者の基底・励起状態の SAC-CI 理論の応用例として行ったことがあり [Can. J. Chem. **63**, 1985, 1857 ], その後実験的に正確な RKR ポテンシャルが多くの研究者によって報告されているので、理論ポテンシャルが実験ポテンシャルをどの程度正確に再現できるかというテスト的な意味もかねて計算を行った。計算は  $\text{Li}_2$  分子の  $\text{Li}(2s) - \text{Li}(2s)$  と  $\text{Li}(2s) - \text{Li}(2p)$  への 2 つの解離に対応する 9 つの状態について行った。計算の詳細などは論文を見ていただくこととして、図 1 の左に実験によって報告されている 7 つの状態の RKR ポテンシャル、右に筆者の FC-LSE 法で計算した 9 つの状態の理論ポテンシャルを示した。

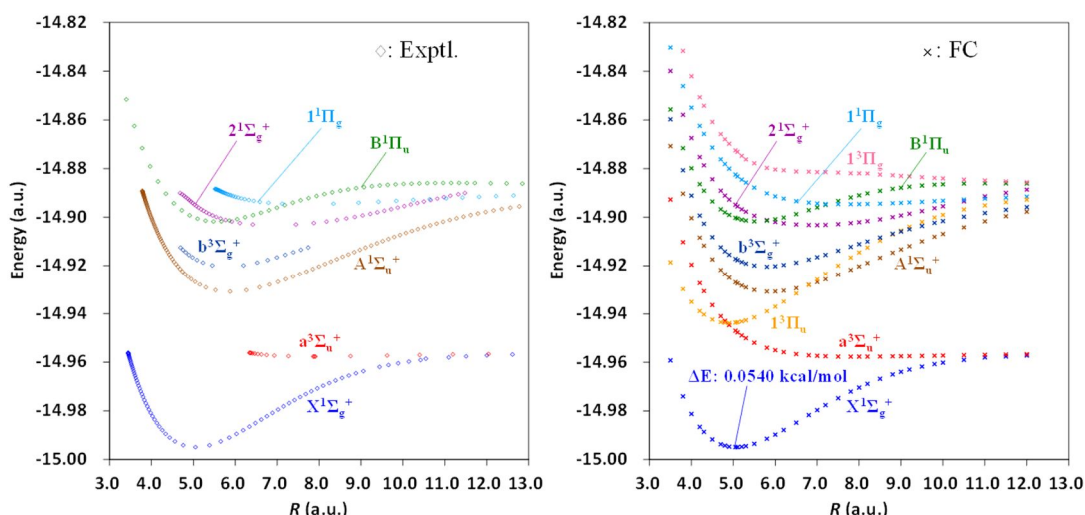


図 1 左、実験による 7 つの状態の RKR ポテンシャル、右、FC-LSE 法で計算した 9 つの状態の理論ポテンシャル

実験ポテンシャルはほぼ全領域で求まっている 5 個の状態、一部しか求まっていない 2 つの状態、全く求まっていない 2 つの状態がある。対して理論ではすべての 9 個のポテンシャルカーブが求まっている。基底状態の平衡核間距離での絶対エネルギーは実験的にも分かっており、-14.994926 hartree である。対して筆者の FC-LSE 理論の結果は -14.994840 hartree であり、その差は 0.0540 kcal/mol に過ぎず、化学精度を満たしている。そこで、理論カーブをそのまま左側に移動し、Energy 軸、Li-Li 距離軸を重ね合わせると、上の 2 図を重ね合わせた図 2 が得られる。ひし形が実験、クロス型が理論であるが 2 つは完全に重なり合って一致している。この結果は、多分シュレーディンガー方程式が発表されて以来、水素原子やその他特殊な小さな系について、シュレーディンガー方程式が自然を見事に正確に記述している例として出された結果の中でも、ひととき見事な理論と実験の一致の実例であると言えないだろう

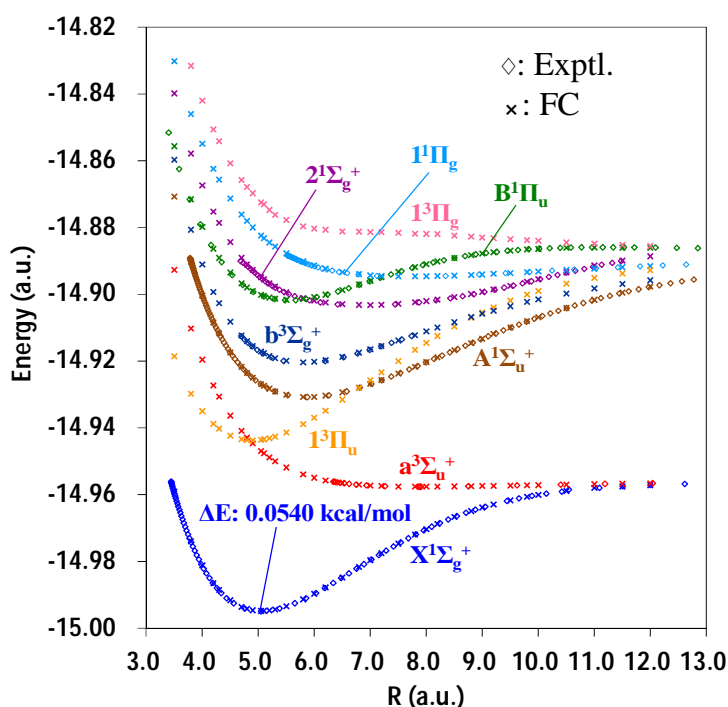


図 2 実験による RKR ポテンシャルと FC-LSE 法による理論ポテンシャルを同じグラフに示したもの

か。旧来の理論では理論値をある程度下にずらしたうえで左に移動し重なり具合を見るといふものであったが、本例はどんぴしゃりの比較で、まさにどんぴしゃりの一致が見られるまさに教科書的な結果である。つまり、今まで解けないと言われていたシュレーディンガー方程式が、筆者の理論と共同研究者の熱い共同研究の結果解けるようになって、 $\text{Li}_2$ 分子の7つの状態のポテンシャル・カーブという熱・光化学反応などを支配する物理量において全くの一致を見たということである。今後、私たちのFC-LSE理論をより発展させて、普通の化学現象をこのような高い予言能のある形で再現あるいは予言する理論体系を作っていきたいと夢見ている。

## 5 . 結語

本研究では、( 1 ) ( 2 ) の研究でまずは足固めをし、( 5 ) の研究で一つ脇道をつけておき、( 7 ) ( 8 ) で確かな理論研究の「王道」を固め、( 9 ) にその成果を一つ花開かせた、と言える。今後、この確かな理論研究の王道を、正確な予言的量子化学の確立へとつなげていきたい。

## 6 . 謝辞

本科学研究費助成事業・挑戦的研究( 開拓 ) に係る研究は、認定 NPO 法人量子化学研究協会・研究所において行われた。本研究の代表者、中辻は、研究所の同僚たる中嶋浩之博士、黒川悠作博士に共同研究を感謝する。また、事務的業務を支えた中辻美恵子にも感謝する。研究に不可欠であった計算は主に分子科学研究所の計算センターの課題 22-IMS-C012 として行われた。深く謝辞を述べたい。また認定 NPO 法人を支えて頂いたご寄付にも感謝する。

## < 引用文献 >

- Hiroshi Nakatsuji, Scaled Schrödinger equation and the exact wave function, *Phys. Rev. Lett.* 93, 2004, 030403
- Hiroshi Nakatsuji, General Method of Solving the Schrödinger Equation of Atoms and Molecules, *Phys. Rev. A*, 72, 2005, 062110
- Hiroshi Nakatsuji, Discovery of a General Method of Solving the Schrödinger and Dirac Equations That Opens a Way to Accurately Predictive Quantum Chemistry, *Acc. Chem. Res.* 45, 2012, 1480
- Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Analytically Solving Relativistic Dirac-Coulomb Equation for Atoms and Molecules, *Phys. Rev. Lett.* 95, 2005, 050407
- H. Nakashima, H. Nakatsuji, *J. Chem. Phys.* 127, 22007, 24104; Y. Kurokawa, H. Nakashima, H. Nakatsuji, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 10, 2008, 4486
- Y. Kurokawa, H. Nakashima, H. Nakatsuji, *Phys. Rev. A*, 72, 2005, 062502; *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 2019, 6327; 22, 2020, 13489
- H. Nakashima, H. Nakatsuji, *Astrophys. J.* 725, 2010, 528; A. Ishikawa, H. Nakashima, H. Nakatsuji, *Chem. Phys.* 401, 2012, 62; H. Nakashima, H. Nakatsuji, *J. Chem. Phys.* 139, 2013, 074105
- Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa, Solving the Schrödinger equation of atoms and molecules: Chemical-formula theory, free-complement chemical-formula theory, and intermediate variational theory, *J. Chem. Phys.* 149, 2018, 114105
- Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, and Yusaku I. Kurokawa, Solving the Schrödinger equation of atoms and molecules with the free-complement chemical-formula theory: First-row atoms and small molecules, *J. Chem. Phys.* 149, 2018, 114106
- H. Nakatsuji, H. Nakashima, Y. Kurokawa, A. Ishikawa, Solving the Schrödinger Equation of Atoms and Molecules without Analytical Integration Based on the Free Iterative-Complement-Interaction Wave Function, *Phys. Rev. Lett.* 99, 2007, 240402
- Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Solving the Schrödinger equation with the free-complement chemical-formula theory. Variational study of the ground and excited states of Be and Li atoms, *J. Chem. Phys.* 2019, 150, 044105
- H. Nakashima, H. Nakatsuji, Inverse Hamiltonian method assisted by the complex scaling technique for solving the relativistic Dirac-Coulomb equation: Helium isoelectronic atoms, *Chem. Phys. Lett.* 749, 2020, 137447
- Hiroshi Nakatsuji, Inverse Schrödinger Equation and the Exact Wave Function, *Phys. Rev. A* 65, 2002, 052122
- Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa, Solving the Schrödinger equation of atoms and molecules using one- and two-electron integrals only, *Phys. Rev. A*. 101, 2020, 062508
- H. Nakashima, H. Nakatsuji, Free complement  $s_{ij}$ -assisted  $r_{ij}$  theory: Variational calculation of the quintet state of a carbon atom, *Phys. Rev. A*, 102, 2020 052835
- Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa, Accurate scaling functions of the scaled Schrödinger equation, *J. Chem. Phys.* 156, 2022, 014113
- 津田孝夫、モンテカルロ法とシミュレーション、培風館、1969。
- Hiroshi Nakatsuji, Jiro Ushio, Tejiro Yonezawa, Cluster Expansion of the Wavefunction. Potential Energy Curves of the Ground, Excited, and Ionized States of  $\text{Li}_2$ , *Can. J. Chem.*, 63, 1985, 1857

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa	4. 巻 156
2. 論文標題 Accurate scaling functions of the scaled Schroedinger equation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 014113-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0077495	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroyuki Nakashima and Hiroshi Nakatsuji	4. 巻 102
2. 論文標題 Free complement sij-assisted rij theory: Variational calculation of the quintet state of a carbon atom	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 052835-1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.102.052835	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroyuki Nakashima, Hiroshi Nakatsuji	4. 巻 749
2. 論文標題 Inverse Hamiltonian method assisted by the complex scaling technique for solving the Dirac-Coulomb equation: Helium isoelectronic atoms	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 137447-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2020.137447	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa	4. 巻 101
2. 論文標題 Solving the Schroedinger equation of atoms and molecules using one- and two-electron integrals only	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 062508-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.101.062508	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima	4. 巻 150
2. 論文標題 Solving the Schroedinger equation with the free-complement chemical-formula theory: Variational study of the ground and excited states of Be and Li atoms	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044105-1-24
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5065565	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tomoo Miyahara, Hiroshi Nakatsuji	4. 巻 123
2. 論文標題 Light-Driven Proton, Sodium Ion, and Chloride Ion Transfer Mechanisms in Rhodopsins: SAC-CI Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 1766-1784
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b10203	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa	4. 巻 149
2. 論文標題 Solving the Schroedinger equation of atoms and molecules: Chemical-formula theory, free-complement chemical-formula theory, and intermediate variational theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114105-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5040376	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Nakatsuji, Hiroyuki Nakashima, Yusaku I. Kurokawa	4. 巻 149
2. 論文標題 Solving the Schroedinger equation of atoms and molecules with the free-complement chemical-formula theory: First-row atoms and small molecules	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114106-1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5040377	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tomoo Miyahara and Hiroshi Nakatsuji	4. 巻 122
2. 論文標題 Accuracy of Td-DFT in the Ultraviolet and Circular Dichroism Spectra of Deoxyguanosine and Uridine	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 100 ~ 118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b09733	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tomoo Miyahara and Hiroshi Nakatsuji	4. 巻
2. 論文標題 Circular Dichroism Spectroscopy with the SAC-CI Methodology: A ChiraSac Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Frontiers of Quantum Chemistry (Publisher: Springer, Editors: Marek J. Wojcik, Hiroshi Nakatsuji, Bernard Kirtman, Yukihiro Ozaki)	6. 最初と最後の頁 21-47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-981-10-5651-2_2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計14件 (うち招待講演 14件 / うち国際学会 14件)

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Keiji Morokuma: His active life for chemistry and for everything
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Recent progress of the free-complement theory for solving the Schroedinger equation
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Free-Complement theory for solving the Schroedinger equation of atoms and molecules
3. 学会等名 ACS Fall 2021 (Prominent Ideas in Quantum Chemistry) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji and Hiroyuki Nakashima
2. 発表標題 Scaled Schroedinger equation and the accurate and efficient methodology for solving the Schroedinger equation formulated therefrom
3. 学会等名 Lowdin Lectures - a 60th Anniversary Celebration (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Solving the Schroedinger equation for doing chemistry easier
3. 学会等名 The University of Utah (Special lecture) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中辻 博
2. 発表標題 量子生命科学への量子化学によるアプローチ
3. 学会等名 量子生命科学 第1回大会(東京大学弥生講堂) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 General electronic structure theory covering exact and variational solutions of the Schroedinger equation
3. 学会等名 7th Japan-Checz-Slovakia (JCS) Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Recent Developments of the Free Complement (FC) Theory
3. 学会等名 16th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Free Complement (FC) Theory as a General Electronic Structure Theory
3. 学会等名 Understanding Chemistry and Biochemistry with Conceptual Models (16th ICQC Satellite meeting) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Special Guest Lecture
3. 学会等名 Gaussian Workshop - Introduction to Guassin: Theory and Practice - (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Solving the Schroedinger equation of atoms and molecules with the free complement theory, FC-CF theory: exact and variational theories
3. 学会等名 255th American Chemical Society (ACS) National Meeting & Exposition (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Compact valence bond wave functions that leads to the exact solution of the Schroedinger equation
3. 学会等名 VB-CI workshop, Institute Henri Poincarre, Paris, France, Mar. 27-30 (2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji (2016 Schroedinger medal of WATOC: For the discovery and development of general methods of solving the Schroedinger equation of atoms and molecules)
2. 発表標題 Plenary talk for WATOC 2016 Schroedinger medal: Exact general theory for solving Schroedinger equations of atoms and molecules: Free-complement theory and applications
3. 学会等名 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Gasteig Cultural Center, Munich, Germany, Aug. 27- Sep. 1 (2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroshi Nakatsuji
2. 発表標題 Solving the Schroedinger equation of atoms and molecules with local free complement theory - Two aspects of the theory -
3. 学会等名 The Eighth Asia-Pacific Conference on Theoretical and Computational Chemistry APCTCC-8, Victor Menezes Convention Centre, Indian Institute of Technology, Mumbai, India, Dec. 15-17 (2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Marek J. Wojcik, Hiroshi Nakatsuji, Bernard Kirtman, and Yukihiro Ozaki (Editors)	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 512
3. 書名 Frontiers of Quantum Chemistry	

〔産業財産権〕

〔その他〕

認定NPO法人量子化学研究協会研究所のホームページ <a href="http://www.qcri.or.jp/">http://www.qcri.or.jp/</a> 受賞: ・ WATOC (World Association of Theoretical and Computational Chemists)より「Schroedinger Medal」を受章 "For the discovery and development of general methods of solving the Schroedinger equation of atoms and molecules" (2017年にPlenary talk) ・ チェコ共和国科学アカデミーより「De scientia et humanitate optime meritis (Honorary Medal)」を授章(2018年5月23日)
--

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------